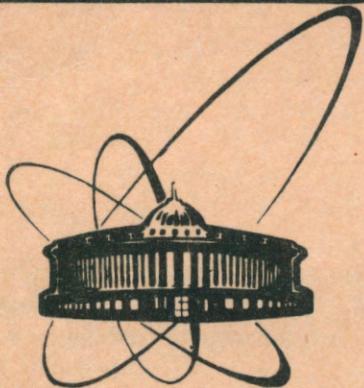


91-320



сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
дубна

РЗ-91-320

А.В.Даниэль\*, В.Ю.Перов\*, Е.А.Сокол

ПРОГРАММА SITHA.

НОВАЯ ВЕРСИЯ МНОГОГРУППОВОЙ СИСТЕМЫ  
НЕЙТРОННЫХ СЕЧЕНИЙ GR175-V1

---

\*Радиевый институт им. В.Г.Хлопина, Ленинград

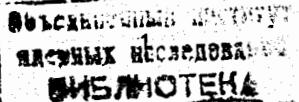
1991

## ВВЕДЕНИЕ

В работе<sup>1/</sup> нами была рассмотрена организация многогрупповой системы нейтронных констант GR175, используемой в комплексе программ SITHA для моделирования переноса нейтронов с энергией ниже 20 МэВ методом Монте-Карло. Названная система констант успешно использовалась нами при изучении нейтронных полей, генерируемых в протяженных мишенях из тяжелых элементов, облучаемых пучками адронов высокой энергии<sup>2/</sup>. Однако область применения комплекса программ была существенно расширена в следующих основных направлениях: моделирование больших детектирующих систем; расчет энерговыделения и спектров потоков нейтронов в узлах сложных конструкций, в состав которых входят легкие элементы<sup>3/</sup>; изучение распространения потоков нейтронов в атмосфере Земли на различных высотах. Общим для всех этих направлений является наличие легких элементов в составе моделируемых объектов. Следствием этого явилась необходимость более корректного описания прямых процессов ( $n$ ,  $2n$ ) и реакций с вылетом нейтрона и заряженной частицы. Данная задача, а также ряд мелких недостатков, затрудняющих использование системы констант GR175 и проявившихся только в процессе эксплуатации, привели к ее существенной модификации. Общая идеология организации системы констант<sup>1/</sup> была сохранена. В тоже время задача согласования новой системы констант, получившей название GR175-V1, со старой версией не ставилась, для нее был написан свой физический модуль и свой интерфейс с геометрическими модулями, входящими в комплекс программ SITHA.

## ОРГАНИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ НЕЙТРОННЫХ КОНСТАНТ GR175-V1

Модификация системы групповых нейтронных констант GR175 коснулась следующих основных моментов. Во-первых, для описания энергетических спектров нейтронов, образующихся в реакциях ( $n$ ,  $2n$ ), ( $n$ ,  $3n$ ) и в реакциях с вылетом заряженных частиц, введена матрица межгрупповых переходов. Оуществлена возможность приближенного учета анизотропии углового распределения вылета нейтронов в указанных реакциях. Во-вторых, максимально возможное число подгрупп в группе было увеличено до пяти, что позволяет надеяться на более качественное описание области резонансов. Другие изменения не носили столь принципиального характера и были направлены на ликвидацию мелких недостатков старой системы констант, влияющих на эффективность ее использования.



Как отмечалось выше, общая идеология организации структуры системы констант<sup>1/</sup>, была сохранена. Информация об одном элементе хранится в двух последовательных записях. Первая запись, всегда фиксированной длины, является заголовком и содержит, в частности, размер второй записи. Вторая запись, информационная, содержит собственно групповые константы для данного элемента. Информационная запись может быть считана в один массив, при этом доступ к отдельным блокам данных, относящихся к одной группе, осуществляется с помощью косвенной адресации, а для доступа к данным внутри блока дополнительного необходим анализ контрольного слова, относящегося к данному блоку и входящему в его состав.

В контролльном слове (32 бита) содержится вся служебная информация о группе, которая включает следующие сведения: наличие в группе подгруппового описания сечений – нулевой бит; о каждой реакции (отводится блок из трех последовательных битов) – нулевая или не нулевая вероятность реакции в данной группе – второй бит в блоке, является ли описание реакции последним в группе – первый бит в блоке, имеется ли информация об угловом распределении нейтронов или распределение изотропное – третий бит в блоке. Такой подход позволяет существенно "скать" объем необходимых данных для одного элемента, что по-прежнему остается актуальной задачей при проведении нейтронных расчетов на ЭВМ.

В системе групповых констант GR175-V1, для одного элемента, могут содержаться следующие данные.

Сечения – полные, реакции ( $n, \gamma$ ), упругого рассеяния, деления, неупругого рассеяния на дискретных уровнях (допускается задание до 40 уровней), неупругого рассеяния на перекрывающихся уровнях, а также сумма сечений реакций ( $n, 2n$ ), ( $n, 3n$ ) и реакций с вылетом нейтрона и заряженных частиц, сумма сечений реакций исчезновения нейтрона за вычетом сечения реакции ( $n, \gamma$ ). Первые четыре типа сечений могут иметь подгрупповое описание.

Данные для описания угловых распределений нейтронов в реакциях упругого рассеяния и в реакциях, моделируемых матрицей межгрупповых переходов. Угловое распределение задается в каждой энергетической группе, где оно неизотропно, таблицей косинусов  $C_i$ , определяющих равновероятные угловые интервалы вылета нейтронов.

Данные для описания энергетических распределений нейтронов: в реакции деления – среднее число нейтронов деления и температура спектра деления для каждой группы; в реакциях неупругого рассеяния на перекрывающихся уровнях – температура испарительного спектра и два значения энергии обрезания спектра сверху и снизу; в реакциях ( $n, 2n$ ), ( $n, 3n$ ) и реакциях с вылетом нейтронов и заряженных частиц – матрица межгрупповых переходов.

## СХЕМА ПОДГОТОВКИ ГРУППОВЫХ КОНСТАНТ

Упрощенная схема подготовки групповых констант представлена на рис.1. Были использованы комплексы программ TSP (LINEAR/RESENT/SIGMA1/

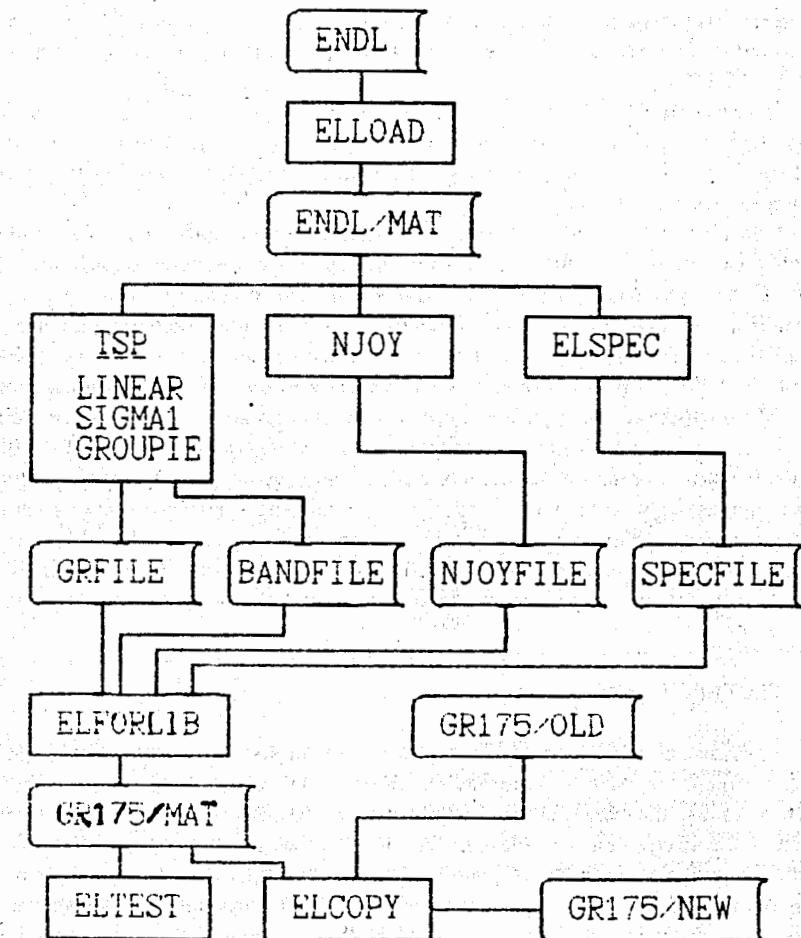


Рис.1. Схема подготовки системы групповых констант GR175-V1.

GROUPIE)<sup>4/</sup> для подготовки групповых сечений и подгрупповых параметров, NJOY<sup>5/</sup> для подготовки матрицы межгрупповых переходов, а также создан ряд оригинальных программ.

ELOAD представляет собой диалоговую программу с встроенным каталогом библиотек оцененных нейтронных данных ENDL-78 и ENDL-84. В программе реализованы следующие возможности: вывод на экран дисплея каталога выбранной библиотеки, листание каталога и отметки интересующих нуклидов, выдача запроса оператору на установку необходимой магнитной ленты с библиотекой, контроль правильности установки ленты и копирование отмеченных нуклидов

на диск. Программа написана на языках высокого уровня REXX и Фортран и использует пакет DMS для организации удобного диалога в системе СВМ ЕС ЭВМ.

Программа ELSPEC служит для подготовки данных по угловому распределению нейтронов и рассмотренных выше параметров, необходимых для описания энергетических спектров нейтронов в реакциях деления и неупругого рассеяния на перекрывающихся уровнях.

Программа ELFORLIB считывает все данные для одного нуклида, выполняет проверку полноты данных и их внутреннюю непротиворечивость, формирует необходимую структуру данных с целью их максимального уплотнения и записывает их на диск. Программа ELTEST считывает подготовленные данные и проверяет их структуру, с заданной степенью детализации. Программа ELCOPY позволяет дополнять, обновлять и копировать библиотеку групповых констант.

Обращение ко всем перечисленным программам и комплексам программ реализовано в виде пакета процедур на языке REXX в системе СВМ ЕС ЭВМ. Созданный пакет процедур позволяет эффективно изменять исходные данные для всех программ и комплексов программ, передавать между ними необходимые файлы, единным образом переключать направление выдачи информации о работе программ – терминал, дисковый файл или виртуальное АЦПУ. В случае сбоя предусмотрена возможность возобновления работы с прерванной программы.

## ТЕСТИРОВАНИЕ

Текущая версия системы групповых нейтронных констант GR175-V1 была подготовлена на базе библиотеки оцененных нейтронных данных ENDL-84. Для тестирования вычислений по программе SITHA, связанных с решением задач о переносе нейтронов в средах, состоящих из легких элементов ( $A < 30$  а.е.м.), были выбраны простые интегральные эксперименты<sup>6-10/</sup> по определению потоков нейтронов из водяных, углеродных, азотных, кислородной и алюминиевой сферических мишней. Источником 14 МэВ нейтронов являлась реакция взаимодействия пучка 400 кэВ дейtronов с тритиевой мишенью, помещаемой в центр изучаемых образцов. Измерения проводились по времязадержкой методике. Отбор тестовых экспериментов определялся требованием по возможности более полного описания условий измерений и характеристик облучаемых образцов, а также практической значимости материалов мишней.

Сводка основных сведений о мишнях приведена в таблице, где через  $I$  обозначена средняя длина свободного пробега нейтрона,  $R$  – радиус мишени (для сферической слоевой алюминиевой мишени – минимальный и максимальный радиусы),  $\vartheta$  – угол между направлением из центра мишени на детектор нейтронов и направлением движения пучка дейtronов,  $L$  – расстояние от источника до детектора нейтронов.

Таблица. Основные характеристики мишней<sup>6-10/</sup>, использованных в расчетах

Материал	$I$	Плотность, $\text{г}/\text{см}^3$	$R, \text{см}$	$\vartheta$	$L, \text{см}$	
$\text{H}_2\text{O}$	1,0	0,998	10,48	27	754	/8/
	1,8	0,998	19,05	27	754	/8/
C	1,3	1,780	10,60	30	766	/6,9/
				120	975	/9/
	2,9	1,847	20,96	30	766	/9/
				120	975	/9/
N	1,0	0,808	19,05	27	763,3	/6/
	3,0	0,808	55,84	30	768	/7/
O	0,73	1,132	10,48	27	754	/7/
Al	0,5	1,22	20,00	55	1050	/10/
			39,00			

В проведенных нами расчетах моделирование источника нейтронов осуществлялось по аналогии с методом, описанным в работах<sup>6,8/</sup>. Углы вылета нейтронов из точечного источника разыгрывались в соответствии с экспериментальной зависимостью<sup>6,8/</sup> потока нейтронов источника от угла  $\vartheta$ . Энергия нейтрона, вылетающего из источника под полученным таким способом углом, определялась по известному кинематическому соотношению<sup>11/</sup>:

$$E_n = E_d \frac{m_d m_n}{(m_n + m_\alpha)^2} \left\{ 2 \cos^2 \vartheta + \frac{m_\alpha (m_\alpha + m_n)}{m_d m_n} \left[ \frac{17.6}{E_d} + \left[ 1 - \frac{m_d}{m_\alpha} \right] \right] + \right. \\ \left. + 2 \cos \vartheta \sqrt{\cos^2 \vartheta + \frac{m_\alpha (m_\alpha + m_n)}{m_d m_n} \left[ \frac{17.6}{E_d} + \left[ 1 - \frac{m_d}{m_\alpha} \right] \right]} \right\},$$

где  $E_d$  – энергия дейтрана (МэВ),  $m_\alpha$ ,  $m_d$ ,  $m_n$  – массы  $\alpha$ -частицы, дейтрана и нейтрона.

Ввиду отсутствия доступной информации об энергетическом распределении дейтранов в пучке, моделирование рассмотренным выше способом было прове-

дено независимо для двух значений "средней" энергии замедляющихся в тритиевой мишени дейтронов  $E_d = 150$  кэВ и  $E_d = 250$  кэВ. Вычисленные указанным способом значения энергий нейтронов источника ( $E_n = 14,9$  МэВ и  $E_n = 15,1$  МэВ, соответственно, при  $\vartheta = 27^\circ$ ) попадают в одну энергетическую группу 175-групповой системы констант, что приводит к практически совпадающим результатам моделирования (рис.3а,б).

При расчетах спектров утечки учитывался вклад в потоки от нейтронов, пересекающих  $15^\circ$ -дугу радиуса  $L$ , расположенную симметрично относительно на-

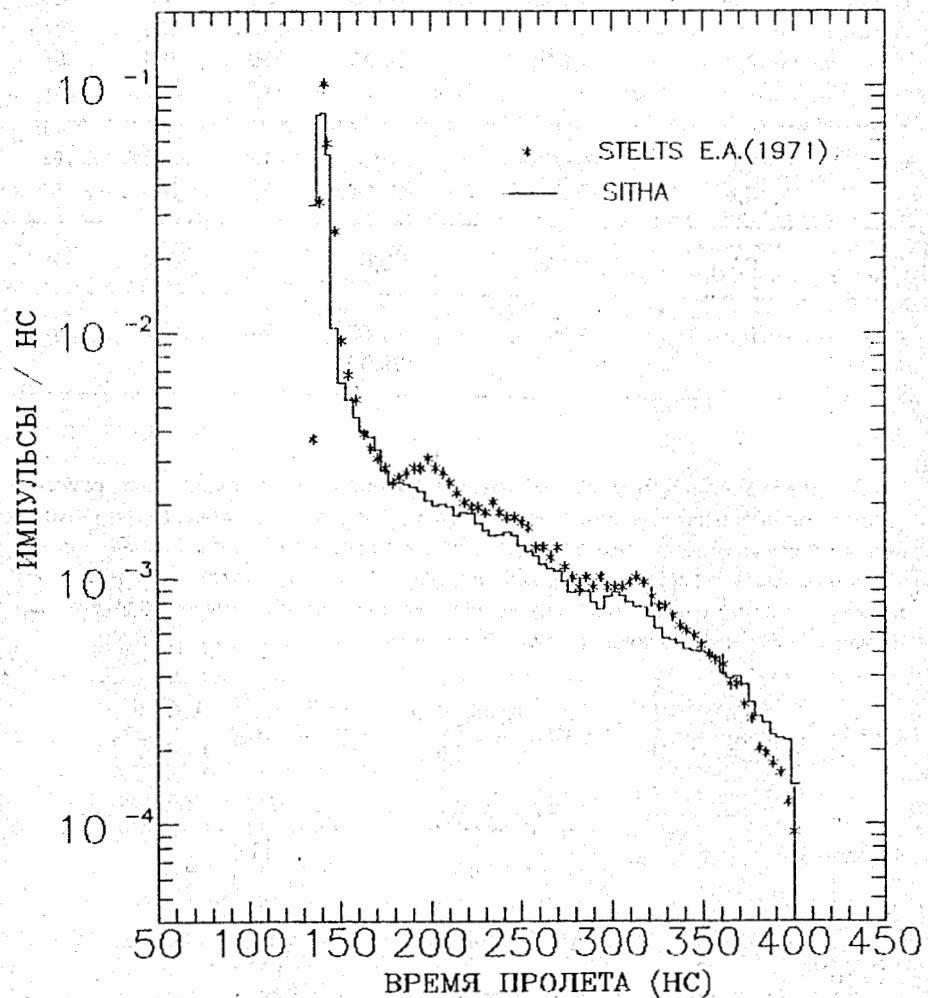


Рис.2. Спектр нейтронов утечки из водяного шара радиуса 10,48 см.

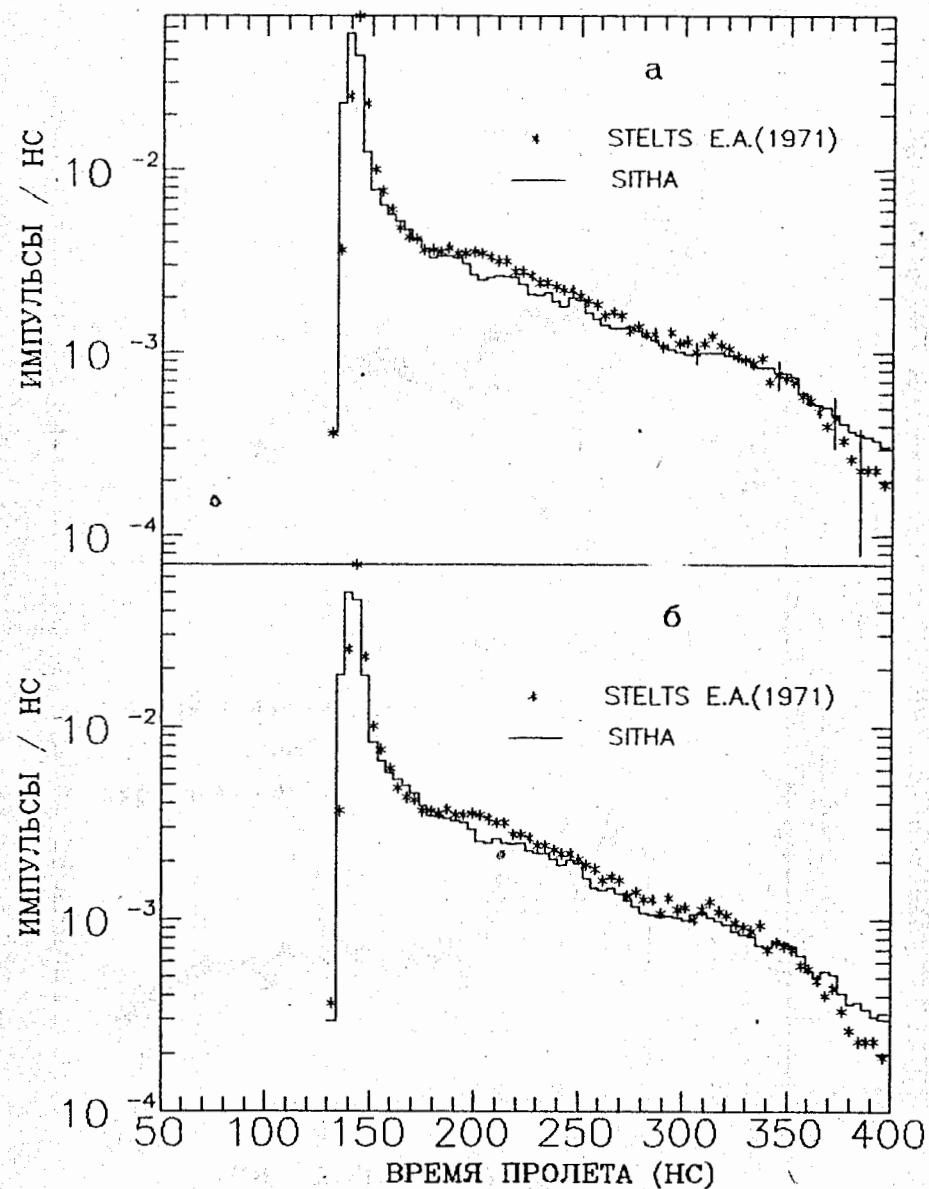


Рис.3. Спектры нейтронов утечки из водяного шара радиуса 19,05 см:  
а – расчет при  $E_d = 250$  кэВ; б – расчет при  $E_d = 150$  кэВ.

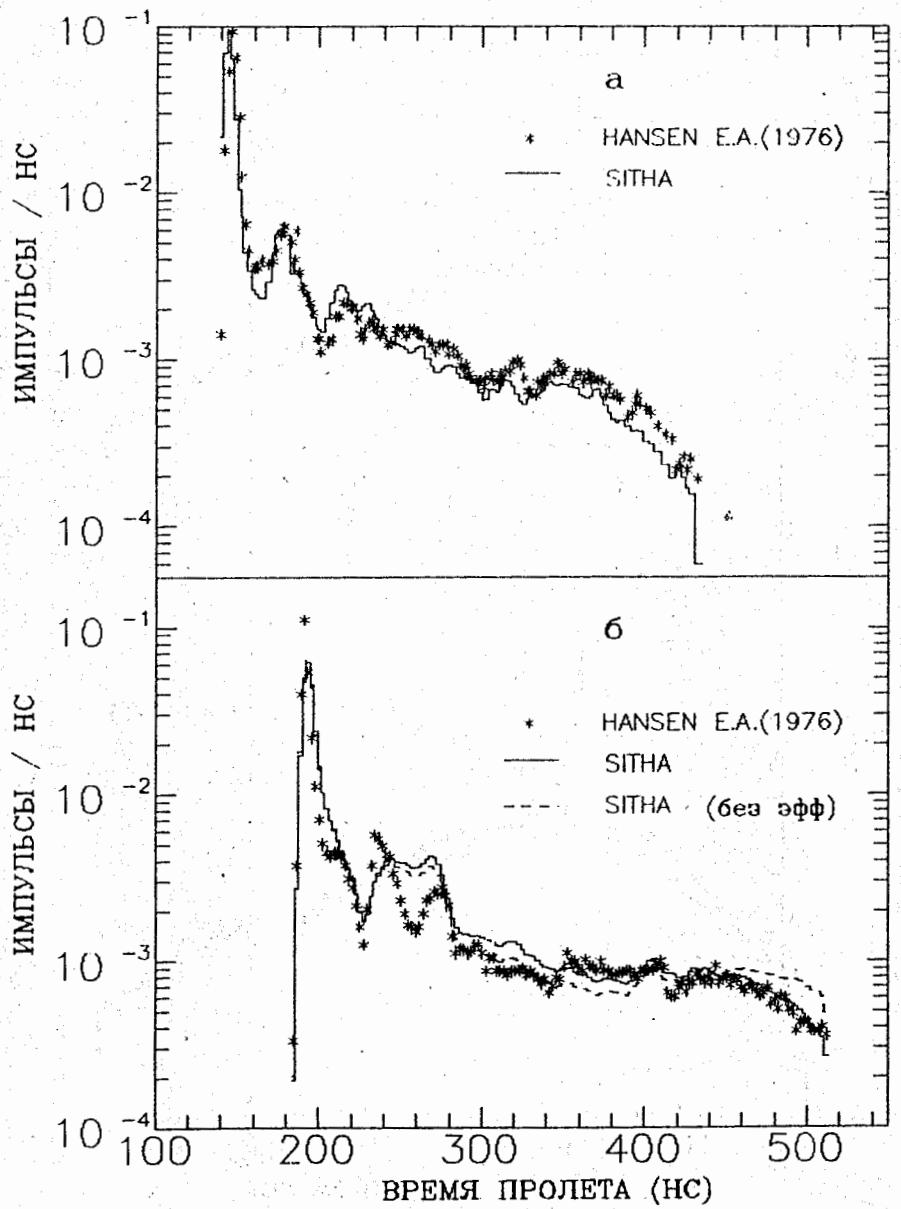


Рис.4. Спектры нейтронов утечки из углеродного шара радиуса 10,60 см под углами к оси пучка дейtronов: а – 30°; б – 90°.

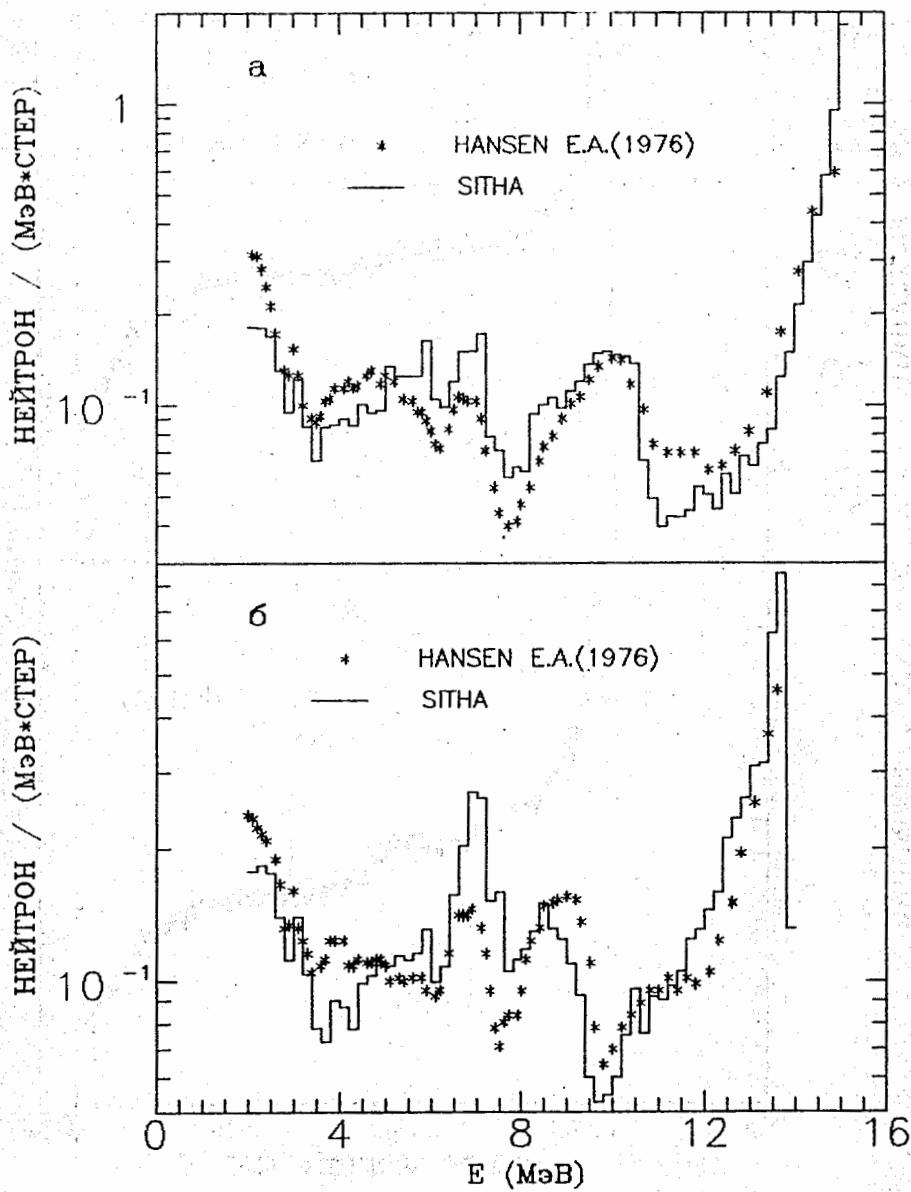


Рис.5. Спектры нейтронов утечки из углеродного шара радиуса 20,96 см под углами к оси пучка дейtronов: а – 30°, б – 120°.

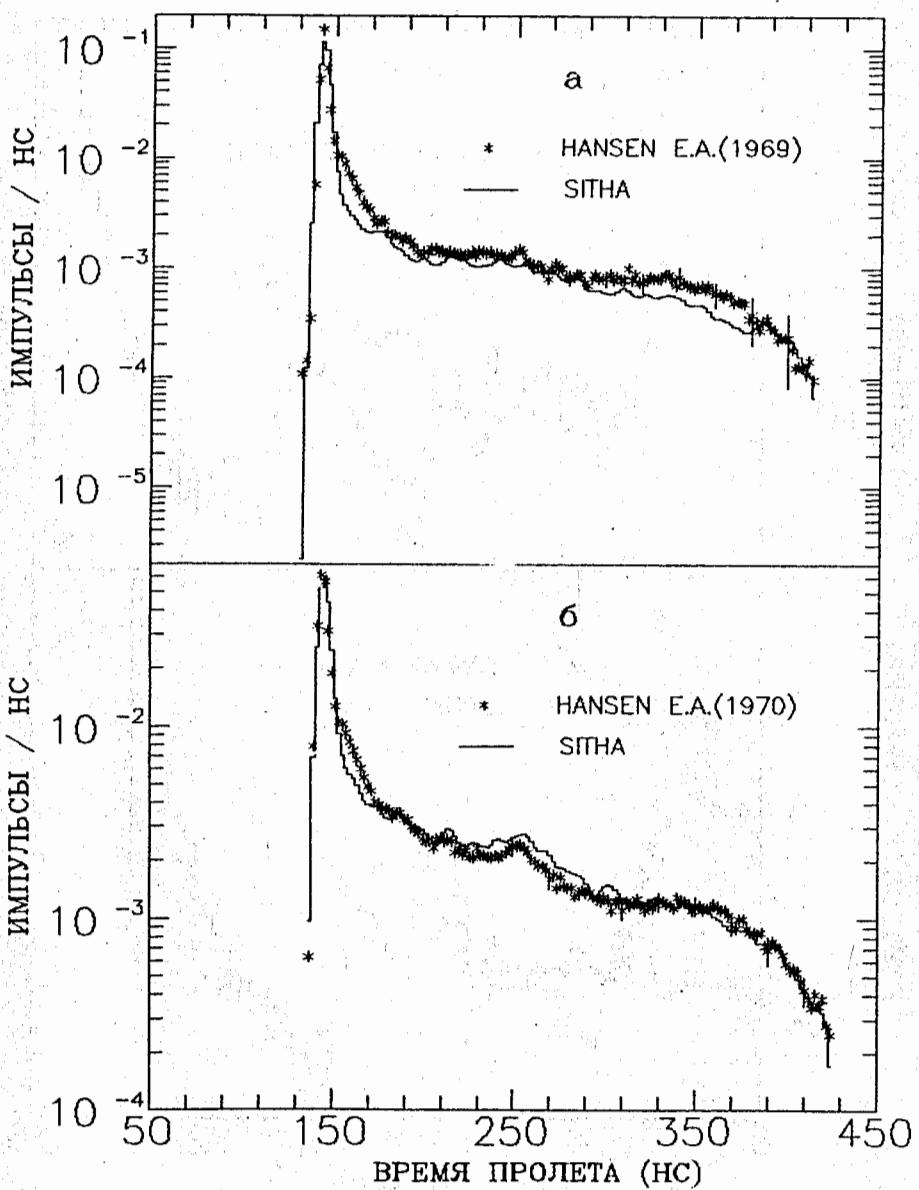


Рис.6. Спектры нейтронов утечки из азотных шаров радиусами: а – 19,05 см; б – 55,84 см.

правления на детектор. Для сравнения с результатами экспериментов в вычисления по программе SITHA вносились поправки на эффективность использованных детекторов нейтронов Pilot B<sup>16,8</sup>/ и NE-213<sup>12</sup>/ . Полученные при моделировании времяпролетные спектры потока нейтронов корректировались с учетом временного разрешения детектирующей системы путем свертки рассчитанного спектра с гауссианой, дисперсия которой на основании приведенных в<sup>16-9</sup>/ графиков была принята равной 2 нс.

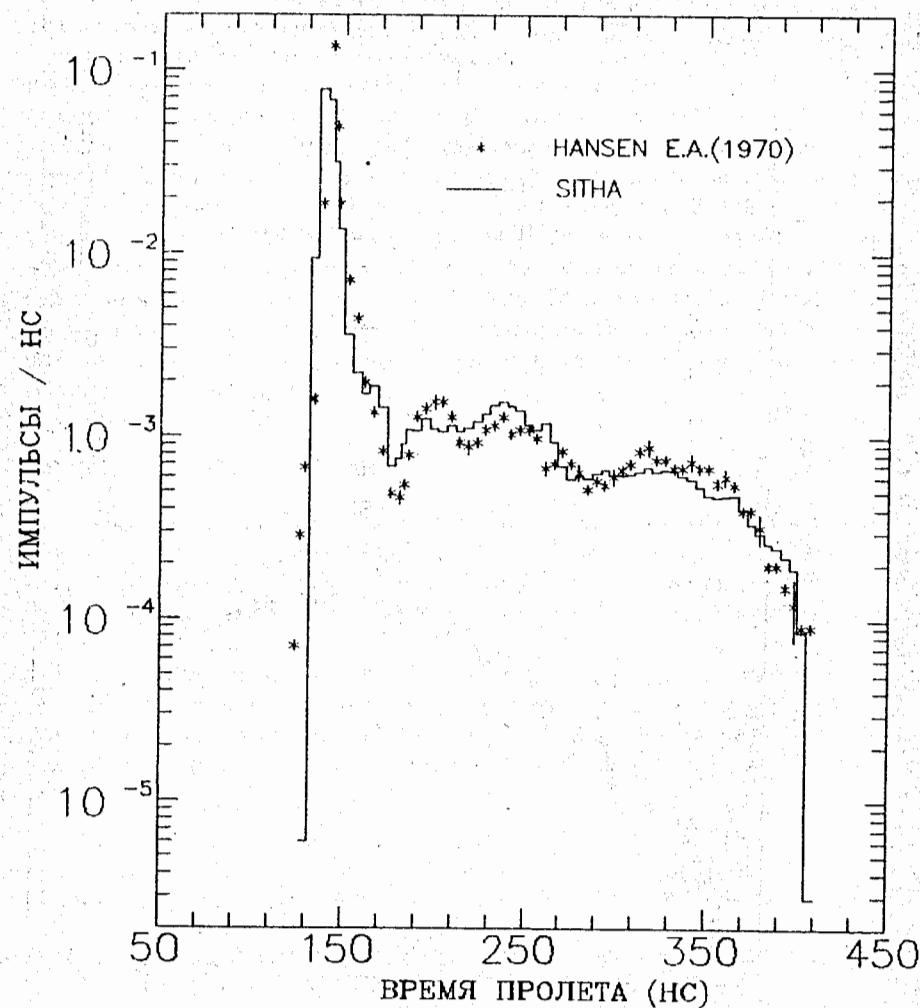


Рис.7. Спектр нейтронов утечки из кислородного шара радиуса 10,48 см под углом 27° к оси пучка дейtronов.

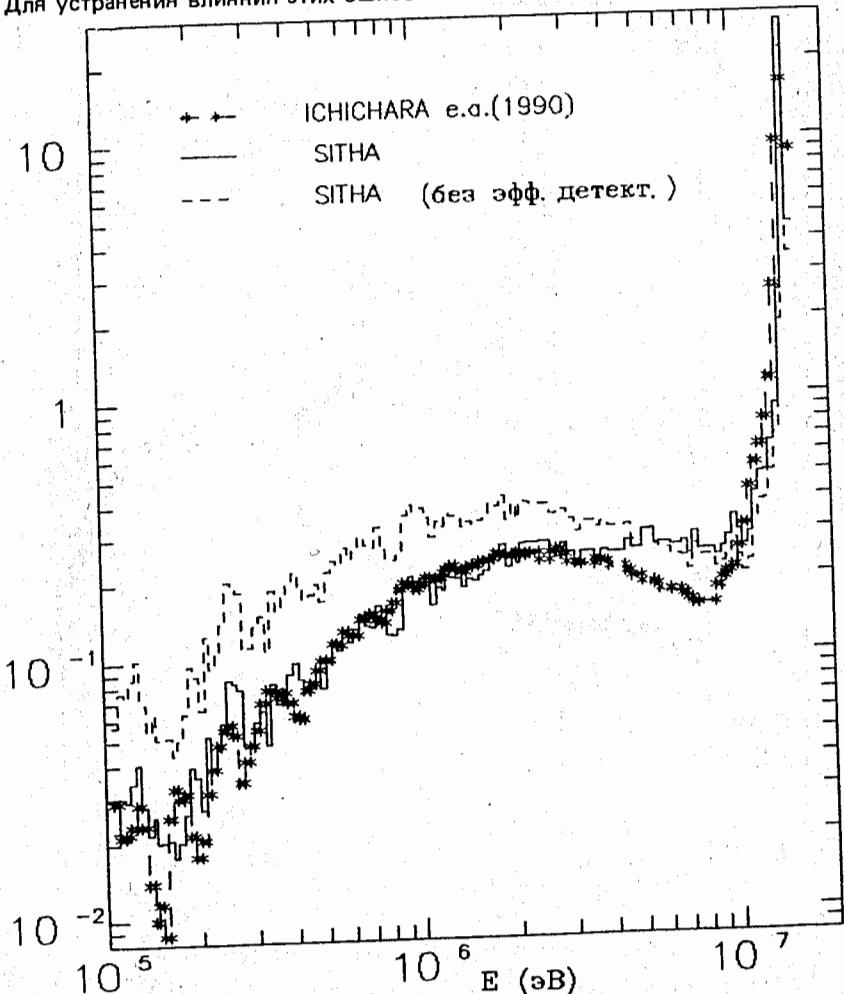


Рис.8. Спектр нейтронов утечки из алюминиевого шарового слоя под углом 55° к оси пучка дейtronов.

Результаты наших расчетов и интегральных экспериментов<sup>6-10/</sup> приведены на рис.3-8. Все кривые, за исключением кривых на рис.5 и рис.8, нормированы к единичным площадям под графиками. Отсутствие полной экспериментальной информации в случае углеродных и алюминиевых мишней, рис.5 и рис.8 соответственно, не позволяет корректно учсть времменное разрешение детектирующей системы, что приводит к существенным ошибкам воспроизведения пика упругого рассеяния при расчетах энергетических спектров нейтронов утечки из мишней. Для устранения влияния этих ошибок на ход кривых вне пика упругого

рассеяния, спектры на рис.5 и рис.8 нормированы к единичным площадям в пределах 2-10 МэВ и 0,1-6 МэВ соответственно. Ошибки вычислений составляли не более 0,5-1,5% в области пика упругого рассеяния и не более 15-20% вне пика. Ошибки измерений приводятся на графиках.

Вычисленные спектры нейтронов утечки из водяных (рис.3), азотных (рис.6), кислородной (рис.7) мишней хорошо согласуются с экспериментальными данными. Наибольшие расхождения с экспериментом для водяных мишней при времени пролета нейтронов около 200 нс обусловлены, по-видимому, недостаточно точным описанием неупругого взаимодействия нейтронов с ядрами кислорода (рис.7). Проверка групповых микроскопических сечений для углерода, полученных на основе библиотеки оцененных нейтронных данных ENDF-84, показала наличие уровня 10,1 МэВ, отсутствующего в файле ENDF/B-VI, а также отсутствие ряда более высоколежащих уровней. Это приводит к 50% ошибкам воспроизведения спектров утечки нейтронов из углеродных мишней в 3 длины свободного пробега при энергии регистрации нейтронов 4-12 МэВ (рис.5). Отметим, что ранее наблюдалось неудовлетворительное описание спектров нейтронов, неупругого рассеянных на ядрах углерода, при использовании файлов оцененных нейтронных данных ENDF/B-III и ENDF/B-IV. Так, например, в работе<sup>12/</sup> авторы достигают хорошего согласия с экспериментальными спектрами путем привлечения данных<sup>13/</sup> по измерению сечений рассеяния нейтронов на ядрах углерода в области энергий 8-15 МэВ.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Созданная версия групповых нейтронных констант GR175-V1 позволяет с приемлемой точностью моделировать перенос нейтронов в средах, состоящих из легких элементов. Точность получаемых результатов в определяющей степени зависит от точности исходных данных, содержащихся в библиотеках оцененных нейтронных данных.

Дальнейшее развитие системы констант, в первую очередь, связано с учетом угловых распределений нейтронов при рассеянии на выделенных уровнях. Актуальным также остается подготовка версии системы констант на базе библиотеки оцененных нейтронных данных ENDF/B-VI.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Даниэль А.В., Душин В.Н. – ВАНТ Сер. Ядерные константы, Вып.2, М.: Атомиздат, 1986, с.20.
2. Даниэль А.В., Душин В.Н. – Препринт РИ-196, М.: ЦНИИатоминформ, 1987.
3. Daniel A.V. et al. – Muon Catalyzed Fusion, 1989, v.4, p.133.
4. Cullen D.E. – Report UCRL-50400, v.17, Part.A-B, 1979, Part C-D, 1980, Lawrence Livermore Laboratory, Calif.

5. MacFarlane R.E. — Report LA-9302-M (ENDF-324), v.I-II, 1982, v.III-IV, 1987.
6. Hansen L.F. et al. — Nucl. Sci. and Engineering, 1969, v.35, p.227.
7. Hansen L.F. et al. — Nucl. Sci. and Engineering, 1970, v.40, p.262.
8. Steltz M.L. et al. — Nucl. Sci. and Engineering, 1971, v.46, p.53.
9. Hansen L.F. et al. — Nucl. Sci. and Engineering, 1976, v.60, p.27.
10. Ichihara C. et al. — JAERI-M, 90-025, 1990, p.5.
11. Интегральные эксперименты в проблеме переноса ионизирующих излучений. Справочное руководство. Ред. Л.А.Трыков, М.: Энергоатомиздат, 1985, с.272.
12. Sekimoto H. et al. — J. Nucl. Sci. and Technol., 1985, v.22, p.174.
13. Haouat G. et al. — Nucl. Sci. and Engineering, 1978, v.65, p.331.

Рукопись поступила в издательский отдел  
10 июля 1991 года.